

飯 田 健 二 (助教) (2013 年 12 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：量子力学，電気化学，統計力学

A-2) 研究課題：

a) ヘテロ界面電子系で発現する光電子機能の理論

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 異種物質が接する事で構成されるヘテロ界面系は，トランジスタやダイオード等の開発に関連してこれまで広く研究が行われてきた。近年では，遷移金属ダイカルコゲナイド等の二次元層状物質を用いて光電子デバイスの開発が盛んに進められており，その機能を設計・制御するために原子レベルの知見が求められている。そこで我々は，第一原理計算プログラム SALMON を用いて，MoS₂-Graphene ヘテロ構造の光誘起電子ダイナミクスを計算した。それにより，光励起に伴い Graphene から MoS₂ へ電子が移動するという実験事実と対応する結果が得られた。そこでこの電子移動の機構を解析したところ，原子レベルの厚みを持つ界面系に特有のものであることが明らかになった。

B-1) 学術論文

M. NODA, S. A. SATO, Y. HIROKAWA, M. UEMOTO, T. TAKEUCHI, S. YAMADA, A. YAMADA, Y. SHINOHARA, M. YAMAGUCHI, K. IIDA, I. FLOSS, T. OTOBE, K.-M. LEE, K. ISHIMURA, T. BOKU, G. F. BERTSCH, K. NOBUSADA and K. YABANA, “SALMON: Scalable Ab-initio Light-Matter simulator for Optics and Nanoscience,” *Comput. Phys. Commun.* **235**, 356–365 (2018).

K. IIDA, M. NODA and K. NOBUSADA, “Photoinduced Electron Transfer at the Interface between Heterogeneous Two-Dimensional Layered Materials,” *J. Phys. Chem. C* **122**, 21651–22658 (2018).

B-4) 招待講演

K. IIDA, “Control of Photoinduced Electron Transfer in MoS₂-Graphene Heterostructure by Applied Bias Voltage,” International Workshop on Nanoscale electron-phonon interactions via energy dissipation and fluctuation, Tokyo (Japan), July 2018.

K. IIDA, “Photoinduced Electron Dynamics of Heterointerface Systems Simulated by Massively Parallel Calculations,” International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations, Tsukuba (Japan), November 2018.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「可視プラズモニクスの新展開：第2世代材料の学理構築」, 飯田健二(研究分担者) (2018年–2021年).